

Исследование свойств сегнетоэлектрических тонких плёнок с помощью модели Изинга с деполяризующим полем

Е.В. Меньшиков, О.Г. Максимова

Череповецкий государственный университет, 162600, Череповец, Россия.

e-mail: eu.menshikoff@ya.ru

Хорошо известно, что свойства тонких сегнетоэлектрических пленок сильно отличаются от объемных образцов. Одним из факторов, дающих вклад в это отличие, является наличие свободных границ и, как следствие, связанных зарядов на них. Связанные заряды создают деполяризующее поле, подавляющее спонтанную поляризацию. В этой работе для исследования тонких пленок была применена модель Изинга [1], в гамильтониан которой мы ввели энергию спина в деполяризующем поле и энергию диполь-дипольных взаимодействий.

Для расчета деполяризующей энергии применен атомистический подход [2]: разность энергий диполь-дипольных взаимодействий двумерно- (2D) и трехмерно- (3D) периодических систем (т.е. при замкнутых и свободных электрических граничных условиях) дает энергию деполяризующего поля. В случае пленок, такой подход дает более точное, большее значение поля на границах и включает эффект поверхностной анизотропии, в отличие от континуального. Однако, различные механизмы экранирования компенсируют связанный заряд [3], что приводит к необходимости решать экранированное уравнение Пуассона. Для этого в матрицу взаимодействий для 2D системы [2], полученную методом периодических функций Грина, введен соответствующий параметр экранирования; для объемной системы был применен метод суммирования Эвальда с потенциалом Юкавы [4].

Моделирование производилось методом Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса. Построены графики профилей поляризации пленки и произведена визуализация полученных конфигураций при различных значениях температуры T (Рис. 1).

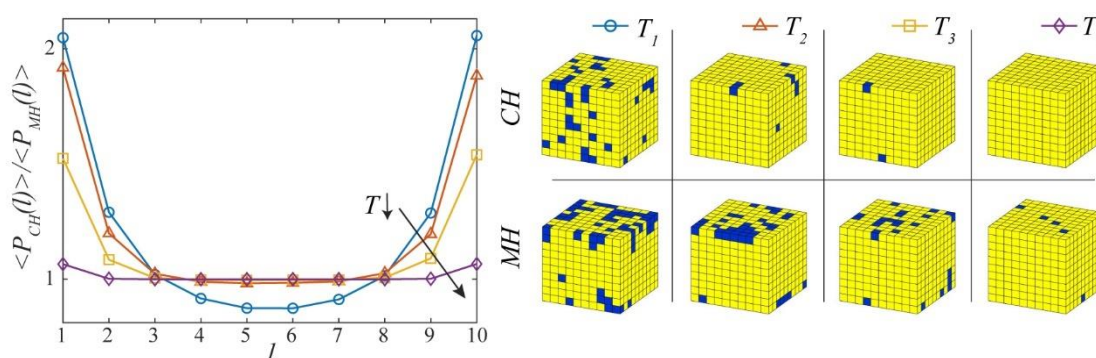


Рисунок 1. Слева – графики зависимости отношения средних поляризаций l -го слоя пленки в моделях с классическим гамильтонианом (CH) и модифицированным (MH), справа – соответствующие однодоменные конфигурации ($T_1 > T_2 > T_3 > T_4$).

Показано, что введение деполяризующего поля и диполь-дипольных взаимодействий может приводить к понижению поляризации приповерхностных слоев, формируя так называемый мертвый слой. Для исследования доменной структуры пленки применен алгоритм иерархической кластеризации. Получены температурные зависимости геометрических параметров, таких как длины проекций на координатные оси; число узлов, входящих в домен и параметра анизотропии.

1. R. Blinc, B. Žekš, *Adv. Phys.* **21**, 693 (1972).
2. I. Ponomareva, I.I. Naumov, I. Kornev, H. Fu, L. Bellaiche, *Phys. Rev. B* **72**, 140102(R) (2005).
3. V.Ya. Shur, A.R. Akhmatkhanov, *Phil. Trans. R. Soc. A* **376**, 20170204 (2018).
4. G. Salin, J.-M. Caillol, *J. Chem. Phys.* **113**, 10459 (2000).